

И.С. Воробьева, магистр 2 г.о.
К.Г. Кичатов, доц., канд.хим.наук
Т.Р. Просочкина, проф., д-р хим.наук
(УГНТУ, г.Уфа)

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ПРОЦЕССА АЛКИЛИРОВАНИЯ БЕНЗОЛА ПРОПИЛЕНОМ

В настоящее время процессы моделирования и прогнозирования играют все большую роль при проектировании и реконструкции предприятий. Особую важность имеют адекватность моделирования процесса и условия, позволяющие получать максимальную прибыль при минимальных затратах. Варьируемыми параметрами при ведении технологического режима на действующих установках получения изопропилбензола часто являются температура и давление проведения технологических процессов, соотношение реагентов, подаваемых в реактор, избыток орошения в колоннах и другие параметры, а в качестве критерия оптимальности – максимальный выход при обеспечении качества товарного продукта [1].

На сегодняшний день в нефтехимической промышленности оптимизация с помощью нейронных сетей нашла применение в процессах коксования [2], производстве стирольных мономеров [3]. Она позволила расчетным способом определять необходимые условия проведения процесса для получения продуктов с заданными параметрами качества.

В работе рассмотрено моделирование процесса алкилирования бензола пропиленом с помощью ПО Aspen HYSYS и Matlab Toolbox. Цель работы – создание нейронной сети, являющейся стохастической моделью, позволяющей подбирать параметры ведения процесса для получения максимального выхода товарной продукции. С помощью ПО Aspen HYSYS была выполнена выборка данных для входных и выходных матриц параметров нейронной сети, ПО Matlab Toolbox применялась для создания топологии нейронной сети и подбора коэффициенты передаточных функций.

Для моделирования реактора в ПО Aspen HYSYS в качестве первого приближения был выбран реактор идеального смешения, поскольку промышленный реактор алкилирования представляет собой пустотелый аппарат с барботированием газа. Кинетическая модель реактора алкилирования учитывала кроме основной реакции

дополнительно 12 побочных реакций, связанных с возможностью образования полиалкилбензолов и наличием в промышленной пропиленовой фракции примесей иных компонентов (пропана, этилена, бутенов-1,2) [4]. Это позволило сформировать детальную кинетическую модель реактора, достаточную для нейронной сети.

Также была смоделирована система разделения до товарного изопропилбензола. Расчетная схема включала 2 колонны, 1 сепаратор, 6 теплообменников, 1 смеситель и 1 насос. На рисунке 1 представлена упрощенная схема производства изопропилбензола.

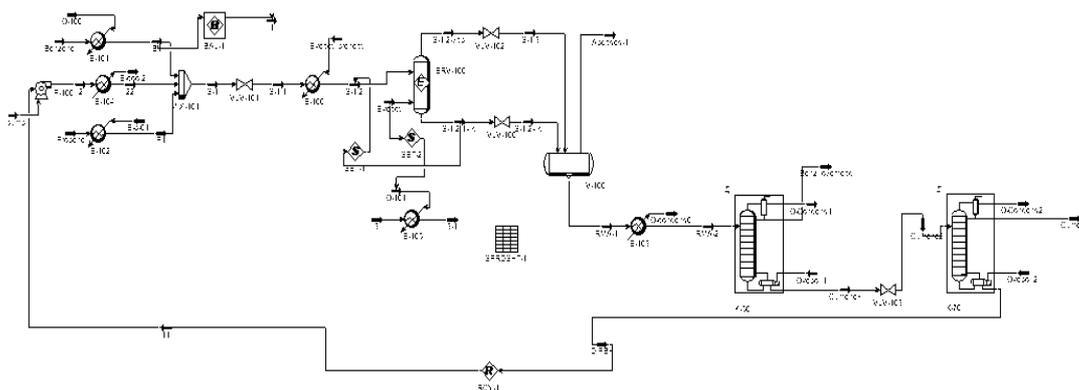


Рисунок 1 – Упрощенная схема производства изопропилбензола

Бензол, пропилен и возвратные диалкилбензолы смешивались, подогревались до 115 °С и подавались в реактор алкилирования. Продукты реакции направлялись в сепаратор для отделения абгазов, после – на разделение в ректификационные колонны для получения возвратного бензола, товарного кумола и возвратных диалкилбензолов.

Для моделирования нейронной сети в качестве входных параметров были выбраны температура реакционной массы алкилирования, давление процесса в реакторе и соотношение бензола к пропилену, выходных – выход ИПБ и массовая концентрация ИПБ в товарном изопропилбензоле. Температура варьировалась в пределах от 128 до 147 °С с шагом 1 °С, давление – от 1,5 до 2,4 кгс/см² с шагом 0,1 кгс/см², избыток бензола над пропиленом – от 3 до 4 раз с шагом 0,1, всего 2200 значений.

В качестве метода оптимизации был выбран алгоритм Levenberg-Marquardt (метод обратного распространения ошибки). Модель нейронной сети состоит из 3 слоев: входного, скрытого и выходного. Чем больше нейронов в скрытом слое, тем больше связей и надежнее работа нейронной сети, но требуется больше время для расчета [5].

Все данные были разбиты на 3 группы: обучающая выборка (данные представляются для обучения нейронной сети, 75 %), выборка для тренировки (данные используются для уменьшения эффекта переобучения, 15 %) и данные для проверки сети (15 %).

Наиболее адекватные результаты были получены при использовании нейронной сети с 2 нейронами в скрытом слое и 12 эпохами обучения, среднеквадратичное отклонение – $0,41 \cdot 10^{-5}$, значение регрессии – 0,9969.

Полученная нейронная сеть является моделью, которые позволят прогнозировать процесс алкилирования наиболее точно без применения результатов моделирования в ПО Aspen HYSYS, что может быть использовано при оптимизации существующих производств.

ЛИТЕРАТУРА

1 Заруцкий С.А. Моделирование процесса получения кумола алкилированием бензола в равновесном реакторе/ С. А. Заруцкий, К. Г. Кичатов, А. П. Никитина, Т. Р. Просочкина, Н. А. Самойлов// НЕФТЕХИМИЯ. – 2018. – том 58. – № 4. – с. 474–479.

2 Зольников В.В. Получение малосернистых коксов из нефтяных остатков ОАО «Салаватнефтеоргсинтез». Уфа, 2008. – 108 с.

3 M. Aghayarzadeh. Simulation and Optimization of Styrene Monomer Production Using Neural Network/ M. Aghayarzadeh, R. Alizadeh, S. Shafiei// Iranian Journal of Chemical Engineering Vol. 11. – No. 1 (Winter). – 2014. – с.30-41.

4 Чудинова А.А. Термодинамический анализ процесса алкилирования бензола пропиленом/ Чудинова А.А, Нурмаканова А.Е., Салищева А.А., Ивашкина Е.Н.//Известия Томского политехнического университета. Инжиниринг георесурсов. – 2015. – Т. 326. – №7. – с.121-127.

5 Саймон Хайкин. Нейронные сети: полный курс, 2-е изд.: Пер.с англ. – М.: ООО"И.Д. Вильямс", 2016. – 1104 с.